



# GUÍA DOCENTE QUÍMICA COMPUTACIONAL GRADO EN QUÍMICA

## 1.- FICHA IDENTIFICATIVA

### Datos de la Asignatura

<b>Código:</b>	34218
<b>Nombre:</b>	QUÍMICA COMPUTACIONAL
<b>Curso académico:</b>	2013-14

### Coordinación

	<b>usuario interno Universitat</b>
1	Ignacio Nilo Tuñón García de Vicuña
2	Ignacio José Nebot Gil
3	Usuario Coord. 3

DESCRIPTORS: Models teòrics i simulació computacional. Mecànica molecular. Dinàmica molecular. Química quàntica. Càlcul de propietats. Aplicacions.

Juntament amb la Teoria i l'Experiment, la Simulació (modelització) és el tercer pilar del coneixement científic. Des de la dècada dels 90, l'evolució de la informàtica ha permès la incorporació útil i efectiva de la modelització en l'entorn Químic: La Química Computacional.

La Química Computacional és un àrea del coneixement multidisciplinària. En ella convergeixen informàtica i documentació, la matemàtica (optimització, àlgebra d'operadors, càlcul, equacions diferencials, etc.) la física i química-física, la química quàntica, la bioquímica, les químiques orgànica, inorgànica i analítica i fins i tot l'enginyeria. Es pretén, doncs, donar una visió global de la Química des de la perspectiva de la modelització com eix vertebrador de tots els coneixements adquirits durant els estudis.

DESCRIPTORES: Modelos teóricos y simulación computacional. Mecánica molecular. Dinámica molecular. Química cuántica. Cálculo de propiedades. Aplicaciones.

Juntamente con la Teoría y el Experimento, la Simulación (modelización) es el tercer pilar del conocimiento científico. Desde la década de los 90, la evolución de la informática ha permitido la incorporación útil y efectiva de la modelización en el entorno Químico: La Química Computacional. □

La Química Computacional es un área del conocimiento multidisciplinar. En ella convergen informática y documentación, la matemática (optimización, álgebra de operadores, cálculo, ecuaciones diferenciales, etc.) la física y química-física, la química

cuántica, la bioquímica, las químicas orgánica, inorgánica y analítica e incluso la ingeniería. Se pretende, pues, dar una visión global de la Química desde la perspectiva de la modelización como eje vertebrador de todos los conocimientos adquiridos durante los estudios.

English

**DESCRIPTORS:** Theoretical models and computational simulation. Molecular mechanics. Molecular dynamics. Quantum chemistry. Calculation of properties. Applications.

Jointly with the Theory and the Experiment, the Simulation (modelling) is the third pillar of the scientific knowledge. From the decade of the 90, the evolution of the computing has allowed the useful and effective incorporation of the modelling in the Chemical surroundings: The Computational Chemistry.

The Computational Chemistry is an area of the multidisciplinary knowledge. In her they converge computer and documentation, the mathematics (optimisation, algebra of operators, calculation, differential equations, etc.) the physics and chemical-physical, the quantum chemistry, the biochemistry, the organic chemists, inorganic and analytical and even the engineering. It pretends, then, give a global vision of the Chemistry from the perspective of the modelling as backbone of all the knowledges purchased during the studies.

### 3.- CONOCIMIENTOS PREVIOS

#### Otros tipos de requisitos

Valencià

**PRERREQUISITS:** Enllaç químic i Estructura de la Matèria, Àlgebra Lineal, Matemàtiques, Càlcul Numèric, Fonaments d'Informàtica, Càlcul Diferencial, Quimiometria, Química Física II, Química Inorgànica, Bioquímica, Química Orgànica (Avançada).

**CONEIXEMENTS PREVIS:** Els impartits en les assignatures prerrequisit, especialment els adquirits com fonaments de matemàtiques, estadística, optimització, mecànica quàntica i espectroscòpia.

Castellano

**PRERREQUISITOS:** Enlace químico y Estructura de la Materia, Álgebra Lineal, Matemáticas, Cálculo Numérico, Fundamentos de Informática, Cálculo Diferencial, Quimiometría, Química Física II, Química Inorgánica, Bioquímica, Química Orgánica (Avanzada).

**CONOCIMIENTOS PREVIOS:** Los impartidos en las asignaturas prerrequisito, especialmente los adquiridos como fundamentos de matemáticas, estadística, optimización, mecánica cuántica y espectroscopia.

English

**PREREQUISITES:** Chemical bond and Structure of the Matter, Linear Algebra, Mathematics, Numeric Calculation, Foundations of Informatics, Differential Calculation, Chemometrics, Physical Chemistry II, Inorganic Chemistry, Biochemistry, Organic Chemistry (Advanced).

**PREVIOUS KNOWLEDGES:** Those given in the prerequisite matters, especially those obtained like as foundations of mathematics, statistics, optimisation, quantum mechanics and spectroscopy.

C1 Capacidad de análisis y síntesis

C2 Capacidad inductiva y deductiva

C3 Capacidad de organización y planificación

C5 Resolución de problemas

C6 Toma de decisiones

C12 Razonamiento crítico

C13 Capacidad de gestión de la información

C14 Capacidad de uso de las tecnologías de la información y comunicación

C15 Compromiso ético con perspectiva de género

C18 Creatividad

C20 Motivación por la calidad

Los estudiantes han de demostrar poseer y comprender conocimientos en:

CE1 Los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades

CE3 Las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos

CE4 Los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas

CE5 Principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas

CE10 La metrología de los procesos químicos incluyendo la gestión de calidad

CE11 La relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de

átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales

CE12 La estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos

CE13 Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química

CE14 Resolución de problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados

CE20 Interpretación de datos procedentes de observaciones y medidas en el laboratorio en términos de su significación y de las teorías que la sustentan

CE22 Capacidad para relacionar teoría y experimentación

CE23 Reconocer y valorar los procesos químicos en la vida diaria

CE24 Comprensión de los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos

- 1.- Demostrar capacitat per a distingir els dominis d'aplicació de les diferents teories, mètodes i models de la Química Computacional (C1, C20, CE3, CE5, CE11, CE12, CE14, CE22).
- 2.- Demostrar capacitat per a seleccionar el mètode adequat al tipus de problema químic i conèixer els errors previstos (C6, C13, C14, CE12, CE13, CE14).
- 3.- Demostrar capacitat per a reconèixer els efectes químic-físics que són tinguts en compte i són necessaris en els càlculs i simulacions de compostos i reaccions químiques (C1, CE3, CE12, CE13, CE24).
- 4.- Demostrar coneixement actualitzat de l'estat de les aplicacions informàtiques ("programari") de càlcul i simulació de major ús en Química Computacional i els seus principals "problemes diana" ("target problems") (C12, C13, C14, CE1, CE11).
- 5.- Demostrar capacitat de generar informació computacional (dades d'entrada ("input"), formats usuals en les aplicacions de Química Computacional...) a partir de dades químiques (fórmules empíriques, moleculars o estructurals, simetria molecular...) (C5, C14, C18, CE1, CE10, CE13, CE14, CE20).
- 6.- Demostrar capacitat de realitzar de simulacions computacionals bàsiques d'estructures moleculars, propietats moleculars i reaccions químiques en fase gas (C3, C14, CE3, CE4, CE11, CE13).
- 7.- Demostrar capacitat de realitzar simulacions computacionals bàsiques en sistemes infinits, mitjans condensats o entorns biològics (C3, C13, C14, C15, CE3, CE11, CE13).
- 8.- Demostrar capacitat d'analitzar i valorar els resultats de les

simulacions computacionals (C1, C2, C3, C6, C12, C13, C14, CE11, CE23, CE24).



- 1.- Demostrar capacidad para distinguir los dominios de aplicación de las diferentes teorías, métodos y modelos de la Química Computacional (C1, C20, CE3, CE5, CE11, CE12, CE14, CE22).
- 2.- Demostrar capacidad para seleccionar el método adecuado al tipo de problema químico y conocer los errores esperables (C6, C13, C14, CE12, CE13, CE14).
- 3.- Demostrar capacidad para reconocer los efectos químico-físicos que son tenidos en cuenta y son necesarios en los cálculos y simulaciones de compuestos y reacciones químicas (C1, CE3, CE12, CE13, CE24).
- 4.- Demostrar conocimiento actualizado del estado de las aplicaciones informáticas ("software") de cálculo y simulación de mayor uso en Química Computacional y sus principales "problemas diana" ("target problems") (C12, C13, C14, CE1, CE11).
- 5.- Demostrar capacidad de generar información computacional (datos de entrada ("input"), formatos usuales en las aplicaciones de Química Computacional...) a partir de datos químicos (fórmulas empíricas, moleculares o estructurales, simetría molecular...) (C5, C14, C18, CE1, CE10, CE13, CE14, CE20).
- 6.- Demostrar capacidad de realizar de simulaciones computacionales básicas de estructuras moleculares, propiedades moleculares y reacciones químicas en fase gas (C3, C14, CE3, CE4, CE11, CE13).
- 7.- Demostrar capacidad de realizar simulaciones computacionales básicas en sistemas infinitos, medios condensados o entornos biológicos (C3, C13, C14, C15, CE3, CE11, CE13).
- 8.- Demostrar capacidad de analizar y valorar los resultados de las simulaciones computacionales (C1, C2, C3, C6, C12, C13, C14, CE11, CE23, CE24).

1. - Demonstrate the ability to distinguish the domains of application of the various theories, methods and models of Chemistry (C1, C20, CE3, CE5, CE11, CE12, CE14, CE22).
2. - Demonstrate the ability to select the appropriate method to the type of chemical problem and know the expected errors (C6, C13, C14, CE12, CE13, CE14).
3. - Demonstrate ability to recognize chemical-physical effects that are taken into account and are required in the calculations and simulations of chemical compounds and reactions (C1, CE3, CE12, CE13, CE24).
4. - Demonstrate current knowledge of the status of applications (Software) for the calculation and simulation of wide use in Computational Chemistry and its main "target problems" (C12, C13, C14, CE1, CE11 ).
5. - Demonstrate ability to generate computational information (input, common formats in Computational Chemistry applications...) from chemical data (empirical, molecular or structural formulas, molecular symmetry...) (C5, C14, C18, CE1, CE10, CE13, CE14, CE20).
6. - Demonstrate ability to perform basic computer simulations of molecular structures, molecular properties and chemical reactions in the gas phase (C3, C14, CE3, CE4, CE11, CE13).
7. - Demonstrate ability to perform basic computer simulations of infinite systems, condensed media or biological environments (C3, C13, C14, C15, CE3, CE11, CE13).
8. - Demonstrate ability to analyse and assess the results of the computer simulations (C1, C2, C3, C6, C12, C13, C14, CE11, CE23, CE24).

## 6.- DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

<b>Número de orden:</b>	1
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Familiarització amb l'entorn de càlcul
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Familiarización con el entorno de cálculo
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Hands-on calculation environment
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
2 sessions d'aula d'informàtica de 1,5 hores cada una:	
<ul style="list-style-type: none"><li>• Química Computacional</li><li>• L'entorn de treball: Linux</li><li>• Energia potencial molecular</li><li>• Especificació de la geometria molecular: matriu-Z</li><li>• L'input de Gaussian</li></ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
2 sesiones de aula de informática de 1,5 horas cada una:	
<ul style="list-style-type: none"><li>• Química Computacional</li><li>• El entorno de trabajo: Linux</li><li>• Energía potencial molecular</li><li>• Especificación geometría molecular: matriz-Z</li><li>• El input de Gaussian</li></ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
2 sessions in the computer lab of 1,5 hours each:	
<ul style="list-style-type: none"><li>• Computational Chemistry</li><li>• Computer work environment: Linux</li><li>• Molecular Potential Energy</li><li>• Molecular geometry specification: Z- matrix</li><li>• Gaussian input</li></ul>	

<b>Número de orden:</b>	2
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Seminari sobre Hartree-Fock (I)
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Seminario sobre Hartree-Fock (I)
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Seminar on Hartree-Fock (I)
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores Equacions de Hartree-Fock (HF)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Hamiltonià molecular</li> <li>• Funcions polielectròniques i monoelectròniques.</li> <li>• Energia molecular: Integrals de core, de Coulomb y d'intercanvi</li> <li>• Regles de Slater</li> <li>• Operadors de Coulomb y d'intercanvi</li> <li>• Obtenció dels spin-orbitals òptims: Teorema de Brillouin</li> <li>• Operador de Fock: Equacions de HF</li> <li>• Equacions canòniques de HF</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas Ecuaciones de Hartree-Fock (HF)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Hamiltoniano molecular</li> <li>• Funciones polielectrónicas y monoelectrónicas.</li> <li>• Energía molecular: Integrales de core, de Coulomb y de intercambio</li> <li>• Reglas de Slater</li> <li>• Operadores de Coulomb y de Intercambio</li> <li>• Obtención de los spin-orbitales óptimos: Teorema de Brillouin</li> <li>• Operador de Fock: Ecuaciones de HF</li> <li>• Ecuaciones canónicas de HF</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours Hartree-Fock (HF) Equations</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Molecular Hamiltonian</li> <li>• Poly-electron and mono-electron functions</li> <li>• Molecular energy: Core Integrals, Coulomb Integrals and exchange Integrals</li> <li>• Slater rules</li> <li>• Coulomb and exchange operators</li> <li>• Optimal spin-orbitals: Brillouin Theorem</li> <li>• Fock operator: HF equations</li> <li>• Canonical HF equations</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	3
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Seminari sobre Hartree-Fock (II)
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Seminario sobre Hartree-Fock (II)
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Seminar on Hartree-Fock (II)
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores</p> <p>Sentit físic de les solucions de les equacions de HF</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Integrals de core, de Coulomb i d'intercanvi</li> <li>• Orbitals ocupats i virtuals</li> <li>• Energia dels orbitals i energia molecular</li> <li>• Teorema de Koopman's</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas</p> <p>Sentido físico de las soluciones de las ecuaciones de HF</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Integrales de core, de Coulomb y de intercambio</li> <li>• Orbitales ocupados y virtuales</li> <li>• Energía de los orbitales y energía molecular</li> <li>• Teorema de Koopman's</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours</p> <p>Physical interpretation of the solutions of the HF equations</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Core integrals, Coulomb integrals and exchange integrals</li> <li>• Occupied and virtual orbitals</li> <li>• Orbital energy and molecular energy</li> <li>• Koopman's theorem</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	4
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Seminari sobre Hartree-Fock (III)
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Seminario sobre Hartree-Fock (III)
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Seminar on Hartree-Fock (III)
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores</p> <p>HF restringit per sistemes en capa tancada: Equacions de Roothaan</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• HF en capa tancada: Spin-Orbitals restringits</li> <li>• Introducció d'una base: Equacions de Roothaan</li> <li>• La densitat de càrrega</li> <li>• Expressió de la matriu de Fock</li> <li>• Ortogonalització de la base</li> <li>• Procediment SCF</li> <li>• Valors esperats i anàlisi de població</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas</p> <p>HF restringido para sistemas en capa cerrada: Ecuaciones de Roothaan</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• HF en capa cerrada: Spin-Orbitales restringidos</li> <li>• Introducción de una base: Ecuaciones de Roothaan</li> <li>• La densidad de carga</li> <li>• Expresión de la matriz de Fock</li> <li>• Ortogonalización de la base</li> <li>• Procedimiento SCF</li> <li>• Valores esperados y análisis de población</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours</p> <p>Restricted HF for closed shell systems: Roothaan equations</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Closed shell HF: Restricted Spin-Orbitals</li> <li>• Introducing a basis set: Roothaan Equations</li> <li>• Charge density</li> <li>• Fock matrix expression</li> <li>• Basis set orthogonalization</li> <li>• SCF procedure</li> <li>• Expectation Values and population analysis</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	5
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Seminari sobre Hartree-Fock (IV)
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Seminario sobre Hartree-Fock (IV)
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Seminar on Hartree-Fock (IV)
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores</p> <p>HF no restringit per sistemes en capa oberta: Equacions de Pople-Nesbet</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• HF en capa oberta: Spin-Orbitals no restringits</li> <li>• Introducció d'una base: Equacions de Pople-Nesbet</li> <li>• Matrius de densitat no restringides</li> <li>• Expressió de les matrius de Fock</li> <li>• Solució de les equacions SCF no restringides</li> <li>• El problema de la dissociació i la seua solució no restringida: la molècula H<sub>2</sub> com exemple</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas</p> <p>HF no restringido para sistemas en capa abierta: Ecuaciones de Pople-Nesbet</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• HF en capa abierta: Spin-Orbitales no restringidos</li> <li>• Introducción de una base: Ecuaciones de Pople-Nesbet</li> <li>• Matrices de densidad no restringidas</li> <li>• Expresión de las matrices de Fock</li> <li>• Solución de las ecuaciones SCF no restringidas</li> <li>• El problema de la disociación y su solución no restringida: la molécula H<sub>2</sub> como ejemplo</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours</p> <p>Unrestricted HF for open shell systems: Pople-Nesbet equations</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Open shell HF: Unrestricted Spin-Orbitals</li> <li>• Basis set introduction: Pople-Nesbet equations</li> <li>• Unrestricted density matrices</li> <li>• Expression of the Fock matrices</li> <li>• Solution of the unrestricted SCF equations</li> <li>• The dissociation problem and its unrestricted solution: H<sub>2</sub> molecule as an example</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	6
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Seminari sobre la teoria del funcional de la densitat
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Seminario sobre la teoría del funcional de la densidad
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Seminar on density functional theory
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores Teoria del funcional de la densitat</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Els principis bàsics de la teoria del funcional de la densitat (DFT)</li> <li>• L'aproximació de Kohn-Sham</li> <li>• Aplicacions de la DFT</li> <li>• Fortaleses i febleses de la DFT</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas Teoría del funcional de la densidad</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Los principios básicos de la teoría del funcional de la densidad (DFT)</li> <li>• La aproximación de Kohn-Sham</li> <li>• Aplicaciones de la DFT</li> <li>• Fortalezas y debilidades de la DFT</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours Density functional theory</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Basic principles of the density functional theory (DFT)</li> <li>• Kohn-Sham approximation</li> <li>• DFT applications</li> <li>• DFT strengths and weaknesses</li> </ul>	



<b>Número de orden:</b>	7
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Mètodes post HF (I)
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Métodos post HF (I)
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Post-HF methods (I)
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores La correlació electrònica</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Correlació electrònica</li> <li>• Propietats formals dels mètodes: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Extensivitat</li> <li>○ Consistència amb la grandària</li> <li>○ N-dependència</li> </ul> </li> <li>• El paper de les configuracions doble i simplement excitades en la funció d'ona</li> <li>• Teoria de perturbacions Rayleigh-Schrodinger</li> <li>• Teoria de perturbacions de molts cossos (MBPT)</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas La correlación electrónica</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Correlación electrónica</li> <li>• Propiedades formales de los métodos: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Extensividad</li> <li>○ Consistencia con el tamaño</li> <li>○ N-dependencia</li> </ul> </li> <li>• El papel de las configuraciones doble y simplemente excitadas en la función de onda</li> <li>• Teoría de perturbaciones Rayleigh-Schrodinger</li> <li>• Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (MBPT)</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours Electron correlation</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Electron correlation</li> <li>• Formal properties of the methods: <ul style="list-style-type: none"> <li>○ Extensivity</li> <li>○ Size-consistency</li> <li>○ N-dependency</li> </ul> </li> <li>• The role of the double and singly excited configurations in the wavefunction</li> <li>• Rayleigh-Schrodinger perturbation theory</li> <li>• Many body perturbation theory (MBPT)</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	8
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Mètodes post HF (II)
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Métodos post HF (II)
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Post-HF methods (II)
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores Mètodes de càlcul de la correlació electrònica</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Mètodes Moller-Plesset MP2 i MP4</li> <li>• Grau d'excitació i ordre de pertorbació</li> <li>• Interacció de configuracions. El problema de la manca de consistència amb la grandària</li> <li>• Teoria de Coupled Cluster</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas Métodos de cálculo de la correlación electrónica</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Métodos Moller-Plesset MP2 y MP4</li> <li>• Grado de excitación y orden de perturbación</li> <li>• Interacción de configuraciones. El problema de la falta de consistencia con el tamaño</li> <li>• Teoría de Coupled Cluster</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours Calculation methods of the electron correlation</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• MP2 and MP4 Moller-Plesset methods</li> <li>• Excitation degree and perturbation order</li> <li>• Configuration interaction. The size-consistency problem</li> <li>• Coupled Cluster theory</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	9
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Interaccions intermoleculares
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Interacciones intermoleculares
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Intermolecular interactions
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores Interaccions intermoleculares</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducció a les interaccions intermoleculares</li> <li>• Interaccions atractives</li> <li>• Interaccions repulsives</li> <li>• Interacció total i models simplificats</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas Interacciones intermoleculares</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducción a las interacciones intermoleculares</li> <li>• Interacciones atractivas</li> <li>• Interacciones repulsivas</li> <li>• Interacción total y modelos simplificados</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours Intermolecular interactions</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introduction to the intermolecular interactions</li> <li>• Attractive interactions</li> <li>• Repulsive interactions</li> <li>• Total interaction and simplified models</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	10
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Mecànica Molecular
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Mecánica Molecular
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Molecular Mechanics
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores Mecànica Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Justificació de la mecànica molecular (MM)</li> <li>• Termes energètics</li> <li>• Parametrització d'un camp de força i exemples</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas Mecánica Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Justificación de la mecánica molecular (MM)</li> <li>• Términos energéticos</li> <li>• Parametrización de un campo de fuerza y ejemplos</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours Molecular Mechanics</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Justification of the molecular mechanics (MM)</li> <li>• Energy terms</li> <li>• Force field parameterization and examples</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	11
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Dinàmica Molecular
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Dinámica Molecular
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Molecular Dynamics
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió de seminari de 1,5 hores Dinàmica Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Justificació dels mètodes de simulació</li> <li>• Definició del sistema: condicions de contorn</li> <li>• Dinàmica Molecular</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 Sesión de seminario de 1,5 horas Dinámica Molecular</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Justificación de los métodos de simulación</li> <li>• Definición del sistema: condiciones de contorno</li> <li>• Dinámica Molecular</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 Seminar session of 1,5 hours Molecular Dynamics</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Justification of the simulation methods</li> <li>• System definition: boundary conditions</li> <li>• Molecular Dynamics</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	12
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Energia i estructura electrònica
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Energía y estructura electrónica
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Energy and electron structure
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió d'Aula d'Informàtica de 3 hores</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Energies d'ionització i afinitats electròniques d'àtoms</li> <li>• Corbes de dissociació: HCl i HH</li> <li>• Visualització de la densitat electrònica i orbitals moleculars: età, etè, etí</li> </ul> <p><b>Conceptes:</b> càlcul HF i funcions de base</p>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 sesión de aula de informática de 3 horas</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Energías de ionización y afinidades electrónicas de átomos</li> <li>• Curvas de disociación: HCl y HH</li> <li>• Visualización de la densidad electrónica y orbitales moleculares: etano, eteno, etino</li> </ul> <p><b>Conceptos:</b> cálculo HF y funciones de base</p>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 session in the computer lab of 3 hours</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ionization Energies and electron affinities of atoms</li> <li>• Dissociation curves: HCl and HH</li> <li>• Visualization of the electron density and molecular orbitals: ethane, ethene, ethine</li> </ul> <p><b>Concepts:</b> HF calculation and basis functions</p>	

<b>Número de orden:</b>	13
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Optimització d'estructures moleculars
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Optimización de estructuras moleculares
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Molecular structure optimization
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>2 Sessions d'Aula d'Informàtica de 3 hores cada una</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Optimització d'una funció: mètodes</li> <li>• Estructures estacionàries. Classificació</li> <li>• Optimització d'estructures HF. Efecte de la base</li> <li>• Mètodes de Funcional de la Densitat</li> <li>• Optimització amb mètodes DFT</li> <li>• Corbes d'Energia potencial</li> <li>• Estructures estacionàries</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>2 sesiones de aula de informática de 3 horas cada una</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Optimización de una función: métodos</li> <li>• Estructuras estacionarias. Clasificación</li> <li>• Optimización de estructuras HF. Efecto de la base</li> <li>• Métodos de Funcional de la Densidad</li> <li>• Optimización con métodos DFT</li> <li>• Curvas de Energía potencial</li> <li>• Estructuras estacionarias</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>2 sessions in the computer lab of 3 hours each</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Function optimization: methods</li> <li>• Stationary structures. Classification</li> <li>• HF structure optimization. Basis set effect</li> <li>• Density functional methods</li> <li>• Optimization with DFT methods</li> <li>• Potential energy curves</li> <li>• Stationary structures</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	14
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Càlculs espectroscòpics
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Cálculos espectroscópicos
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Spectroscopic calculations
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió d'Aula d'Informàtica de 3 hores</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Espectroscòpia rotacional, vibracional i electrònica</li> <li>• Modes normals</li> <li>• Termoquímica</li> </ul> <p><b>Conceptes:</b> transicions entre nivells energètics. Funcions de partició, propietats termodinàmiques</p>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 sesión de aula de informática de 3 horas</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Espectroscopia rotacional, vibracional y electrónica.</li> <li>• Modos normales.</li> <li>• Termoquímica</li> </ul> <p><b>Conceptos:</b> transiciones entre niveles energéticos. Funciones de partición, propiedades termodinámicas</p>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 session in the computer lab of 3 hours</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Rotational, vibrational and electron spectroscopy</li> <li>• Normal modes</li> <li>• Thermochemistry</li> </ul> <p><b>Concepts:</b> transitions between energy levels. Partition functions, thermodynamic properties</p>	



<b>Número de orden:</b>	15
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Reactivitat química
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Reactividad química
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Chemical reactivity
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió d'Aula d'Informàtica de 3 hores</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Superfície d'Energia Potencial (SEP)</li> <li>• Estat de Transició</li> <li>• Camí de mínima energia</li> <li>• Teoria de l'Estat de Transició</li> <li>• Càlcul de la SEP de la reacció química <math>F^- + CH_3Cl</math></li> <li>• Càlcul de la constant de velocitat</li> <li>• Localització directa d'estats de transició</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 sesión de aula de informática de 3 horas</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Superficie de Energía Potencial (SEP)</li> <li>• Estado de Transición</li> <li>• Camino de mínima energía</li> <li>• Teoría del Estado de Transición</li> <li>• Cálculo de la SEP de la reacción química <math>F^- + CH_3Cl</math></li> <li>• Cálculo de la constante de velocidad</li> <li>• Localización directa de estados de transición</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 session in the computer lab of 3 hours</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Potential Energy Surface (PES)</li> <li>• Transition state</li> <li>• Minimum energy path</li> <li>• Transition State Theory</li> <li>• PES Calculation for the <math>F^- + CH_3Cl</math> chemical reaction</li> <li>• Calculation of the rate constant</li> <li>• Direct localization of transition states</li> </ul>	

<b>Número de orden:</b>	16
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Efectes del dissolvent sobre processos químics
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Efectos del disolvente sobre procesos químicos
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Solvent effects on chemical processes
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió d'Aula d'Informàtica de 3 hores</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Models discret i continu</li> <li>• Efecte del dissolvent sobre l'equilibri tautomèric</li> <li>• Efecte del dissolvent sobre l'equilibri conformacional</li> <li>• Efecte del dissolvent sobre la reactivitat química</li> </ul> <p><b>Conceptes:</b> interaccions intermoleculares</p>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 sesión de aula de informática de 3 horas</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelos discreto y continuo</li> <li>• Efecto del disolvente sobre el equilibrio tautomérico</li> <li>• Efecto del disolvente sobre el equilibrio conformacional</li> <li>• Efecto del disolvente sobre la reactividad química</li> </ul> <p><b>Conceptos:</b> interacciones intermoleculares</p>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 session in the computer lab of 3 hours</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Discrete and continuous models</li> <li>• Effect of the solvent on the tautomer equilibrium</li> <li>• Effect of the solvent on the conformational equilibrium</li> <li>• Effect of the solvent on the chemical reactivity</li> </ul> <p><b>Concepts:</b> intermolecular interactions</p>	

<b>Número de orden:</b>	17
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Càlculs de Dinàmica Molecular
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Cálculos de Dinámica Molecular
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Molecular Dynamics Calculations
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>1 Sessió d'Aula d'Informàtica de 3 hores</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducció a la descripció de grans sistemes</li> <li>• Camps de força. El cas de l'aigua</li> <li>• Dinàmica Molecular de l'aigua líquida. Funció de distribució radial i número de coordinació</li> <li>• DM de dissolucions aquoses. Coeficient de difusió</li> <li>• DM de biomolècules. Plegament de proteïnes</li> </ul> <p><b>Conceptes:</b> espai configuracional</p>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>1 sesión de aula de informática de 3 horas</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introducción a la descripción de grandes sistemas</li> <li>• Campos de fuerza. El caso del agua</li> <li>• Dinámica Molecular del agua líquida. Función de distribución radial y número de coordinación</li> <li>• DM de disoluciones acuosas. Coeficiente de difusión</li> <li>• DM de biomoléculas. Plegamiento de proteínas</li> </ul> <p><b>Conceptos:</b> espacio configuracional</p>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>1 session in the computer lab of 3 hours</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Introduction to the description of large systems</li> <li>• Force fields. The water case</li> <li>• Molecular Dynamics of the liquid water. Radial distribution function and coordination number</li> <li>• MD of aqueous solutions. Diffusion coefficient</li> <li>• MD of biomolecules. Protein folding</li> </ul> <p><b>Concepts:</b> configuration space</p>	

<b>Número de orden:</b>	18
<b>Nombre de la U.T. (Valencià):</b>	Aplicacions
<b>Nombre de la U.T. (Castellano):</b>	Aplicaciones
<b>Nombre de la U.T. (English):</b>	Applications
<b>Descripción de contenidos (Valencià):</b>	
<p>2 Sessions d'Aula d'Informàtica de 3 hores cada una</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Desenvolupament de dos xicotets projectes on els estudiants apliquen els conceptes i els mètodes que s'han explicat en els continguts del curs en el seu conjunt.</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (Castellano):</b>	
<p>2 sesiones de aula de informática de 3 horas cada una</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Desarrollo de dos pequeños proyectos en los que los estudiantes aplican los conceptos y los métodos que se han explicado en los contenidos del curso en su conjunto.</li> </ul>	
<b>Descripción de contenidos (English):</b>	
<p>2 sessions in the computer lab of 3 hours each</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Development of two small projects where the students apply the concepts and methods that have been explained in the course contents as a whole..</li> </ul>	

TIPOS DE ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	Horas
Asistencia a eventos y actividades externas	0
Elaboración de trabajos individuales	10
Elaboración de trabajos en grupo	0
Estudio y trabajo autónomo	30
Lecturas del material complementario	2,5
Preparación de actividades de evaluación	10
Preparación de clases de teoría	10
Preparación de clases prácticas y de problemas	5
Resolución de casos prácticos	0
Resolución de cuestionarios on-line	0
<b>TOTAL</b>	<b>67,5</b>

**Sessions pràctiques en aula d'informàtica:** Comprenen 8 sessions pràctiques de 3 hores.

Consisteixen en una primera part, de durada al voltant de 30 minuts, en la qual el professor explica de forma resumida els fonaments i les tècniques necessàries per a l'execució de la pràctica. En una segona part, de durada al voltant de 2,5 hores, es duu a terme el desenvolupament de la pràctica usant els paquets informàtics adequats. Corresponen a les unitats temàtiques UT1 i des de la UT12 a la UT16.

Està previst que el treball pràctic de cada sessió s'haja d'acabar de forma autònoma per part de l'alumne emprant al voltant de 16 hores de les 30 de treball autònom. La conclusió de la pràctica consisteix a acabar els càlculs i en la redacció d'un breu informe dels resultats que s'ha de lliurar en el termini màxim d'una setmana. La dedicació mitjana per part de l'alumne és de 2 hores de treball autònom, per sessió.

Amb l'objectiu que l'alumne puga disposar, per al seu treball autònom, d'exactament el mateix conjunt de programes que s'usa a l'aula d'ordinadors, les pràctiques es duran a terme utilitzant un disc virtual que conté el sistema operatiu i tots els programes de càlcul necessaris en l'assignatura i del qual els alumnes en disposaran d'una còpia.

**Seminaris:** Consisteixen en 10 sessions de 1,5 hores, en forma de seminari, on s'exposaran els conceptes fonamentals de la Química Computacional, fent relleu dels aspectes més importants per a l'aplicació dels mètodes de càlcul. Corresponen a les unitats temàtiques UT2 a UT11.

**Treballs pràctics personalitzats:** En les dues darreres sessions pràctiques en aula d'informàtica, els estudiants hauran de desenvolupar dos xicotets projectes de càlcul utilitzant el conjunt dels conceptes i mètodes del curs. Està previst que el treball pràctic de cada sessió s'haja d'acabar de forma autònoma per part de l'alumne emprant al voltant de 14 hores, la resta de les 30 de treball autònom. La conclusió dels projectes consisteix a acabar els càlculs i en la redacció d'un informe dels resultats que s'ha de lliurar en el termini màxim d'una setmana. La dedicació mitjana per part de l'alumne és de 7 hores de treball autònom, per sessió. Corresponen a la unitat temàtica UT17.

**Sesiones prácticas en aula de informática:** Comprenden 8 sesiones prácticas de 3 horas. Consisten en una primera parte, de duración de alrededor de 30 minutos, en la que el profesor explica de forma resumida los fundamentos y las técnicas necesarias para la ejecución de la práctica. En una segunda parte, de duración de alrededor de 2,5 horas, es lleva a término el desarrollo de la práctica usando los paquetes informáticos adecuados. Corresponden a las unidades temáticas UT1 y desde la UT12 a la UT16.

Está previsto que el trabajo práctico de cada sesión se tenga que finalizar de forma autónoma por parte del alumno utilizando alrededor de 16 horas de las 30 de trabajo autónomo. La conclusión de la práctica consiste en acabar los cálculos y en la redacción de un breve informe de los resultados que se tiene que entregar en el plazo máximo de una semana. La dedicación media por parte del alumno es de 2 horas de trabajo autónomo, por sesión.

Con el objetivo de que el alumno pueda disponer, para su trabajo autónomo, de exactamente el mismo conjunto de programas que se usa en el aula de ordenadores, las prácticas se realizarán utilizando un disco virtual que contiene el sistema operativo y todos los programas de cálculo necesarios en la asignatura y del que los alumnos dispondrán de una copia.

**Seminarios:** Consisten en 10 sesiones de 1,5 horas, en forma de seminario, donde se expondrán los conceptos fundamentales de la Química Computacional, haciendo hincapié en los aspectos más importantes para la aplicación de los métodos de cálculo. Estas sesiones se dividen en dos partes: en la primera el profesor expone los fundamentos del tema y los aspectos más importantes. En la segunda, de aproximadamente 30 minutos, los estudiantes, individualmente o por parejas, expondrán aspectos complementarios del mismo tema, tales como desarrollos de ecuaciones o evaluaciones críticas de la aplicación de los métodos. La asignación de los temas a los estudiantes se hará en el primer día de curso. Corresponden a las unidades temáticas UT2 a UT11.

**Trabajos prácticos personalizados:** En las dos últimas sesiones prácticas en aula de informática, los estudiantes tendrán que desarrollar dos pequeños proyectos de cálculo utilizando el conjunto de los conceptos y métodos del curso. Está previsto que el trabajo práctico de cada sesión se tenga que acabar de forma autónoma por parte del alumno utilizando alrededor de 14 horas, el resto de las 30 de trabajo autónomo. La conclusión de los proyectos consiste en acabar los cálculos y en la redacción de un informe de los resultados que se tiene que entregar en el plazo máximo de una semana. La dedicación media por parte del alumno es de 7 horas de trabajo autónomo, por sesión. Corresponden a la unidad temática UT17.

**Practical sessions in the computer room:** Includes eight 3-hour practical sessions. They consist of a first part, lasting about 30 minutes, in which the teacher summarizes the fundamentals and techniques necessary for the implementation of the practice. In a second part, lasting about 2.5 hours, the student carries out the practice development using appropriate software packages. They correspond to thematic units UT1 and from UT12 to UT16.

It is planned that practical work of each session will need to be completed independently by the student using about 16 of the 30 hours of autonomous work. The conclusion of the practice is to finish the calculations and writing a brief report of the results that must be delivered within a maximum of one week. The average dedication by the student is 2 hours of autonomous work, per session.

In order to the student may have, for independent work, exactly the same set of programs used in the computer room, the exercises will be made using a virtual disk that contains the operating system and all necessary calculation programs in the course, and the students will have a copy of that DVD.

**Seminars:** They consist of 10 sessions of 1.5 hours, as a seminar, where the fundamental concepts of Computational Chemistry will be presented, emphasizing the most important aspects for the application of the methods of calculation. They correspond to thematic units UT2 to UT11.

**Personalized Practical work:** In the last two practice sessions in the computer lab, students will have to develop two small calculation projects using the whole of the course concepts and methods. It is expected that the student will end independently the practical work of each session, using about 14 hours, the remaining of the 30 hours of autonomous work. The conclusion of the project is to finish the calculations and drafting of a report of the results that must be delivered within a maximum of one week. The average dedication of the student is 7 hours of autonomous work, per session. They correspond to the thematic unity UT17.



Per a l'avaluació de l'assignatura Química computacional es valoraran:

- Proves consistents en exàmens escrits i/o treballs pràctics: 60%
- Avaluació de seminaris (participació i material a lliurar), elaboració de treballs i exposicions orals: 10%
- Avaluació contínua de cada alumne, basada en l'assistència regular a les classes i activitats presencials, participació i grau d'implicació en el procés d'ensenyament-aprenentatge: 10%
- Avaluació d'informes, memòries i comunicació oral: 20%

Para la evaluación de la asignatura Química computacional se valorarán:

- Pruebas consistentes en exámenes escritos y/o trabajos prácticos, se valorará también la exposición oral de los trabajos: 60%
- Evaluación de la participación en los seminarios, especialmente del material elaborado y de la exposiciones orales: 10%
- Evaluación de informes y memorias correspondientes a las sesiones prácticas: 20%
- Evaluación continua de cada alumno, basada en la asistencia regular a las clases y actividades presenciales, participación y grado de implicación en el proceso de enseñanza-aprendizaje: 10%

For assessment of the Computational Chemistry course it will be taken into account:

- Tests consistent in written exams and/or practical works: 60%
- Assessment of seminars (participation and material to be delivered), preparation of papers and oral presentations: 10%
- Continuous assessment of each student, based on regular attendance at school and classroom activities, participation and degree of involvement in the teaching-learning process: 10%
- Assessment of reports and oral communication: 20%

## 10.- REFERENCIAS

### 10.1 Referencias Básicas

<b>Referencia b1:</b>	Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. C.J. Cramer. Wiley, 2004
<b>Referencia b2:</b>	Computational Chemistry. Introduction to Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. 2ª Ed. Errol G. Lewars. Springer, 2011
<b>Referencia b3:</b>	Introduction to Computational Chemistry. Frank Jensen. Wiley, 1999

...

### 10.2 Referencias Complementarias

<b>Referencia c1:</b>	Química Cuántica: fundamentos y aplicaciones computacionales. J. Bertrán Rusca, V. Brachandell Gallo, M. Moreno Ferrer y M. Sodupe Ferrer. Síntesis. Madrid, 2000
<b>Referencia c2:</b>	Química Cuántica. Ira N. Levine (5a edición). Prentice Hall, 2001
<b>Referencia c3:</b>	Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Attila Szabo y Neil S. Ostlund. Dover, 1996

...